★ スパース解法 —貪欲法 —

次のような ℓ_0 最小化問題の解き方を考えよう．

$$\min_{\boldsymbol{x}} \|\boldsymbol{x}\|_0 \quad \text{subject to} \quad \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}. \tag{33}$$

貪欲法 [14]（greedy algorithm）とは何か？おつりを作る作業を思い出そう．なるべく少ない枚数のコインで 623 円をどのように作るか？内輪で残額に最も近い額のコインを選ぶことを繰り返せばよい [15]．

線形結合 $\boldsymbol{b} = x_1\boldsymbol{a}^{(1)} + \cdots + x_n\boldsymbol{a}^{(n)}$ を思い出そう．基底ベクトル $\boldsymbol{a}^{(j)}$ はコインである．金額 $\boldsymbol{b}$ を作るために使うコイン $\boldsymbol{a}^{(j)}$ の係数 x_j だけ非ゼロにする．選んだコインを表す非ゼロ係数の番号（添え字）の集合を T とする．なるべく少ない枚数のコインで金額 $\boldsymbol{b}$ を作ろう．残額 $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ に最も似ているコイン $\boldsymbol{a}^{(s)}$ を選び，残額が最も減るように非ゼロ成分の $\boldsymbol{x}_{T\cup\{s\}}$ を最小二乗法で更新すればよい．

OMP

OMP（orthogonal matching pursuit）[1, 2, 3] は，アルゴリズム 1 のようにスパース解を求める貪欲法である．

アルゴリズム 1 Orthogonal matching pursuit: $\boldsymbol{x} = \mathrm{OMP}(\boldsymbol{b}, \boldsymbol{A}, k, \delta)$

入力： $\boldsymbol{b}$: m 次元ベクトル，$\boldsymbol{A}$: $m \times n$ 行列，k: 非ゼロ成分の最大個数，δ: 許容誤差;

出力： $\boldsymbol{x}$: k スパースな n 次元ベクトル;

1 $\boldsymbol{x} := \boldsymbol{0} \in \mathbb{R}^n$;
2 台の初期値を $T := \emptyset$（空集合）とする;
3 $\boldsymbol{r} := \boldsymbol{b}$;
4 **while** $|T| \le k$ かつ $\|\boldsymbol{r}\|_2/\|\boldsymbol{b}\|_2 > \delta$ **do**
5 　各基底と残差の類似度 $\boldsymbol{c} := \boldsymbol{A}^\top\boldsymbol{r}$ を計算する;
6 　最も類似している列の番号 $s := \arg\max_j |c_j|$ を見つける;
7 　$T := T \cup \{s\}$ として s を台に加える;
8 　台 T で示された非ゼロ成分を $\boldsymbol{x}_T := \arg\min_{\boldsymbol{z}\in\mathbb{R}^{|T|}} \|\boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}_T\boldsymbol{z}\|_2^2$ のように最小二乗解で更新する．
9 　残差 $\boldsymbol{r} := \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ を計算する;
10 **end while**

貪欲法は，ゼロベクトルを解 $\boldsymbol{x}$ の初期値とし，残差が十分に小さくなる（$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ が十分に $\boldsymbol{b}$ の近似になる）まで $\boldsymbol{x}$ の非ゼロ成分を次々と見つけるアルゴリズムになっている．よって，非ゼロ成分の個数程度の反復回数で解が得られる．各反復において最も計算量が大きい手続きは，ステップ 5 の類似度計算（$\mathcal{O}(mn)$）と，ステップ 8 の最小二乗解 $\boldsymbol{x}_T$ の計算である [16]．最小二乗法の手間数は $\mathcal{O}(m|T|^2)$ なので，$k^2 \ll n$ ならば OMP の手間数は $\mathcal{O}(mk^3)$ と見積もられる．

---

[14] 欲張り法ともいう．

[15] 用意されているコインが 1，5，10，50，100，500 円玉ならば必ず最適解が得られる．しかし，貪欲法はどんなコインの組合せ問題も解けるわけではない．例えば，もし 1，6，13 円玉の 3 種類だとしたら，18 円を 3 枚の 6 円玉で作れるのに，貪欲法では 1 枚の 13 円玉と 5 枚の 1 円玉の計 6 枚が選ばれる．

[16] この最小二乗解は $\boldsymbol{x}_T = (\boldsymbol{A}_T^\top\boldsymbol{A}_T)^{-1}\boldsymbol{A}_T\boldsymbol{b}$ と書ける．これを右から順に直接に計算する方法の他に，$\boldsymbol{A}_T$ の特異値分解を利用する方法，連立方程式 $\boldsymbol{A}_T^\top\boldsymbol{A}_T\boldsymbol{x}_T = \boldsymbol{A}_T\boldsymbol{b}$ を共役勾配法で解く方法などがある．